

05

## **Молекулярно-динамическое исследование возможности термофлуктуационного механизма генерации структурных дефектов при высокоскоростной деформации**

© С.Г. Псахье, К.П. Зольников, Д.С. Крыжевич, А.Г. Липницкий

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск  
E-mail: root@ispms.tomsk.ru

Поступило в Редакцию 12 августа 2005 г.

Исследована возможность генерации дефектов структуры в материалах с идеальной кристаллической решеткой в широком температурном интервале при динамическом нагружении. Расчеты проводились в рамках метода молекулярной динамики с применением многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, полученных в приближении метода погруженного атома. Показано, что тепловые флуктуации могут приводить к скачкообразному зарождению дефектов в материалах с идеальной структурой при высокоскоростной деформации. Исследованы особенности зарождения дефектов структуры в зависимости от температуры для различных условий нагружения.

PACS: 61.72.Cc

Изучение атомных механизмов зарождения и развития дефектных областей, в том числе, в материалах с исходно идеальной структурой в условиях механического нагружения является одной из наиболее важных фундаментальных проблем в физике твердого тела [1,2]. Экспериментальное исследование зарождения дефектов структуры является достаточно сложной проблемой, поскольку ее решение связано со значительными трудностями, обусловленными необходимостью высокого временного ( $10^{-14}$  s) и пространственного ( $10^{-9}$  m) разрешения, поэтому компьютерное моделирование на основе молекулярной динамики является эффективным способом исследования как генерации дефектов структуры, так и динамики их развития.

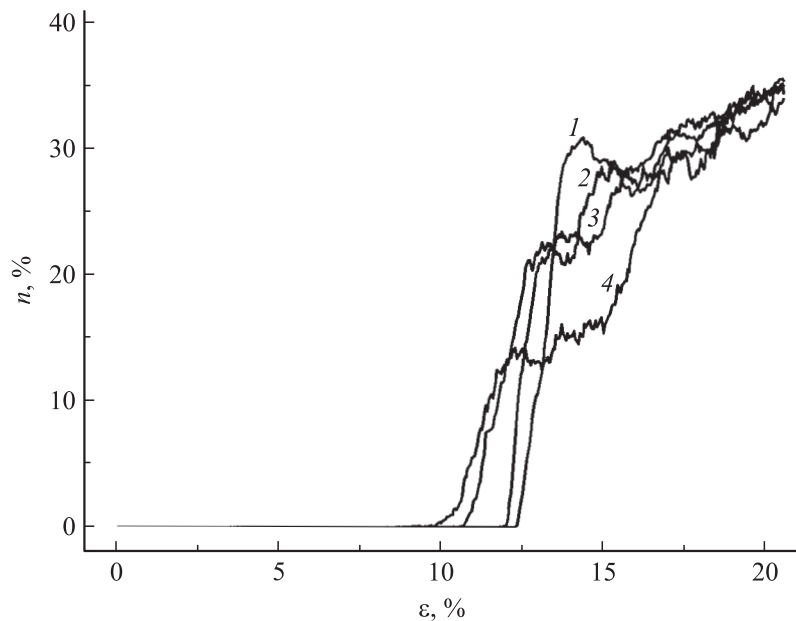
В настоящей работе проведено молекулярно-динамическое исследование возможности зарождения структуры при высокоскоростной деформации. Моделирование проводилось в широком температурном интервале (100–700 К) для различных кристаллографических направлений, вдоль которых прикладывалась нагрузка.

Для решения поставленных в работе задач использовался метод молекулярной динамики. Межатомное взаимодействие описывалось в рамках метода погруженного атома [3,4]. Отметим, что используемые потенциалы позволяют с высокой точностью описывать структурные, механические и энергетические свойства как в объеме самого материала, так и вблизи его свободных поверхностей.

Моделируемый кристалл меди имел форму параллелепипеда, для исключения влияния граничных эффектов в работе использовались периодические граничные условия во всех направлениях. Анализ структуры деформированного кристалла проводился на основе алгоритма, предложенного в [5], учитывающего топологию структурных связей каждого атома с ближайшими соседями. В соответствии с этим алгоритмом каждой паре атомов сопоставлялся набор из четырех чисел: первое число характеризует „отношения“ атомов („1“ — если эти атомы являются соседями, „2“ — в противном случае), второе число — количество общих соседей у данной пары атомов, третье число — количество связей между общими соседями, четвертое число — количество связей в самой длинной непрерывной цепочке, которая проходит через соседей данной пары. Для идеальной ГЦК-структуры каждый атом характеризуется 12 наборами чисел  $\{1/4/2/1\}$ , для ГПУ-структуры — 6 наборами чисел  $\{1/4/2/1\}$  и 6 наборами  $\{1/4/2/2\}$ , для ОЦК-структуры 8 наборами  $\{1/0/0/0\}$ .

Исходный монокристалл меди был ориентирован следующим образом: ось  $X$  была направлена вдоль кристаллографического направления  $[110]$ , ось  $Y$  — вдоль  $[1\bar{1}0]$ , а ось  $Z$  — вдоль  $[001]$ . Известно, что при равномерном сжатии монокристалла вдоль направления  $[001]$  на величину около 20% и одновременном растяжении вдоль направлений  $[110]$  и  $[1\bar{1}0]$  на величину около 12% исходная ГЦК-структура трансформируется в ОЦК-решетку. При этом изменение потенциальной энергии, приходящейся на один атом, составляет несколько сотых электронвольта. Отметим, что атомный объем, приходящийся на один атом, в процессе деформирования оставался неизменным.

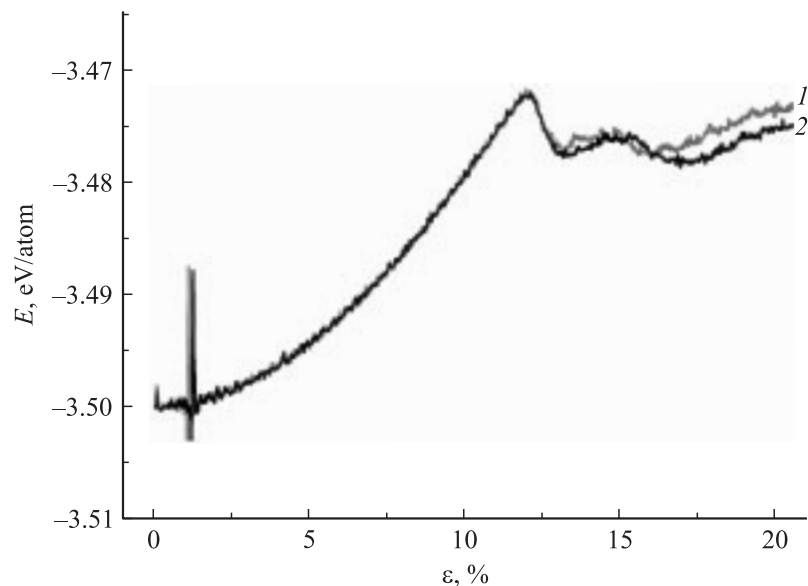
При моделировании использовались следующие начальные условия: скорость сжатия вдоль оси  $Z$  составляла примерно 50 m/s, а скорости



**Рис. 1.** Зависимость доли атомов ( $n$ ) с топологией структурных связей, соответствующих ГПУ-решетке, от степени деформации для различных температур кристалла: 1 — 100 К; 2 — 300 К; 3 — 500 К; 4 — 700 К. Скорость сжатия вдоль оси  $Z$  составляет 50 м/с.

растяжения в других направлениях соответствовали вышеприведенному геометрическому алгоритму перевода ГЦК-структуры в ОЦК. Для изучения влияния температуры на структурный отклик моделируемого кристаллита расчеты проводились при: 100, 300, 500, 700 К.

На рис. 1 показано интегральное влияние температуры на зарождение и развитие дефектов структуры при высокоскоростной деформации образца. Из рисунка видно, что при низких температурах происходит практически скачкообразный рост дефектов структуры, с повышением же температуры зарождение областей с локальным изменением структуры происходит более плавно и начинается при меньших степенях деформации. Это подтверждает термофлуктуационную природу генерации областей с локальными структурными изменениями (при более



**Рис. 2.** Зависимость потенциальной энергии, приходящейся на один атом, от степени деформации при 300 К для скорости сжатия 50 м/с по схеме А (1) и по схеме Бейна (2).

высоких температурах происходит более раннее зарождение структурных дефектов). Характерно, что доля структурных дефектов при низких температурах выше, что связано с более высоким уровнем закаченной упругой энергии.

Отметим, что существуют и другие геометрические пути нагружения, при которых ГЦК-структура может трансформироваться в ОЦК-решетку. Хорошо известен путь перестройки решетки по схеме Бейна, который заключается в следующем [6]: первоначальная ГЦК-решетка ( $c/a = 1$ ) сжимается вдоль направления [100] и одновременно растягивается на одинаковую величину в направлениях [010] и [001] так, что первоначальный объем, приходящийся на один атом, остается постоянной величиной. При отношении  $c/a = 1/\sqrt{2}$  решетка трансформируется в ОЦК. Расчеты показали, что ход изменения потенциальной энергии при деформациях вдоль этих направлений качественно

аналогичен вышеописанному случаю, так как перевод из ГЦК в ОЦК в обоих случаях не связан с преодолением энергетического барьера, поэтому следовало ожидать, что и отклик образца будет подобным. Это подтвердили не только кривые зависимости доли областей локальных структурных изменений, но и общий ход зависимостей потенциальной энергии от степени деформации, который для обоих случаев приведен на рис. 2. Следует отметить, что, как показал анализ результатов, скачок потенциальной энергии при низких степенях деформации ( $\sim 2\%$ ) связан с тем, что характерные скорости структурных изменений, необходимых для релаксации моделируемого кристалла, в данном интервале деформаций значительно меньше скорости нагружения.

Таким образом, проведенные молекулярно-динамические исследования позволяют сделать вывод о том, что в материалах с исходно идеальной кристаллической структурой при высокоскоростной механической деформации тепловые флуктуации атомов могут быть причиной генерации структурных дефектов. При этом в рассмотренных случаях характер зарождения и развития дефектов структуры в значительной степени определяется температурой образца и в меньшей степени зависит от схемы нагружения.

## Список литературы

- [1] *Schiötz J., Leffers T., Singh B.N.* // *Phil. Mag. Lett.* 2001. V. 81. N 5. P. 301–309.
- [2] *Kiritani M., Satoh Y., Kizuka Y. et al.* // *Phil. Mag. Lett.* 1999. V. 79. N 10. P. 797–804.
- [3] *Daw M.S., Baskes M.I.* // *Phys. Rev.* 1984. V. B29. N 12. P. 6443–6453.
- [4] *Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S.* // *Phys. Rev.* 1986. V. B33. N 12. P. 7983–7991.
- [5] *Van Swygenhoven H., Farkas D., Caro A.* // *Phys. Rev.* 2000. V. B62. N 2. P. 831–838.
- [6] *Mishin Y.* // *Phys. Rev.* 2001. V. B63. P. 224106.